

i ASIGNATURA QUÍMICA FÍSICA II

Código	40208016
Titulación	GRADO EN QUÍMICA
Módulo	MÓDULO II - FUNDAMENTAL
Materia	MATERIA II.2 QUÍMICA FÍSICA
Curso	2
Duración	PRIMER SEMESTRE
Tipo	OBLIGATORIA
Idioma	CASTELLANO
ECTS	6,00
Teoría	3,25
Práctica	4,25
Departamento	C127 - QUIMICA FISICA

✓ REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos

Haber superado al menos 12 créditos de la Materia Química del Módulo Básico

Recomendaciones

Haber superado la asignatura de Química II

Haber superado la asignatura de Física I

Haber superado la asignatura de Matemáticas I y II

Conocimientos sobre nomenclatura química y unidades tanto en física como en química

 **RESULTADO DEL APRENDIZAJE**

Id.	Resultados
1	Conocer los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de las propiedades de los átomos, las moléculas y los sólidos.
2	Conocer el origen de los fenómenos espectroscópicos y el fundamento cuántico de las diferentes técnicas para la determinación de los diversos parámetros estructurales moleculares.
3	Reconocer la importancia de la Química Física y su impacto en la sociedad industrial y tecnológica.
4	Capacidad para comprender y predecir el comportamiento y reactividad de átomos y moléculas a partir del análisis de su estructura, que podrá determinarse a partir de datos espectroscópicos.
5	Adquirir destreza en el manejo de las principales técnicas instrumentales empleadas en química y poder determinar a través del trabajo experimental las propiedades estructurales.
6	Destreza en el tratamiento y propagación de errores de las magnitudes medidas en el laboratorio y destreza en el manejo de programas informáticos para llevar a cabo el tratamiento de datos experimentales.
7	Destreza en el manejo de programas informáticos de cálculo de propiedades microscópicas de la materia, y de programas de simulación de aquellas técnicas que por su alto coste no es posible tener en el laboratorio.
8	Comprender y utilizar la información bibliográfica y técnica referida a los fenómenos fisicoquímicos.

 **COMPETENCIAS**

Id.	Competencia	Tipo
CE16	Utilizar las técnicas instrumentales y describir sus aplicaciones.	ESPECÍFICA
CE21	Recordar y explicar los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química.	ESPECÍFICA
CE22	Aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.	ESPECÍFICA
CE23	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.	ESPECÍFICA
CE24	Reconocer y llevar a cabo buenas prácticas en el trabajo científico.	ESPECÍFICA
CE25	Exponer, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.	ESPECÍFICA
CE26	Manejar y procesar informáticamente datos e información química.	ESPECÍFICA
CE29	Observar, hacer el seguimiento y medir propiedades, eventos o cambios químicos, y registrar de forma sistemática y fiable la documentación correspondiente.	ESPECÍFICA
CE30	Manejar instrumentación química estándar, como la que se utiliza para investigaciones estructurales y separaciones.	ESPECÍFICA
CE31	Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan.	ESPECÍFICA
CE4	Aplicar las técnicas principales de investigación estructural, incluyendo espectroscopia, a la caracterización de sustancias.	ESPECÍFICA
CE6	Enunciar los principios de mecánica cuántica y aplicarlos a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.	ESPECÍFICA

Id.	Competencia	Tipo
CG1	Capacidad de análisis y síntesis.	GENERAL
CG13	Capacidad para utilizar con fluidez la informática a nivel de usuario.	GENERAL
CG2	Capacidad para comunicarse fluidamente de manera oral y escrita en la lengua nativa.	GENERAL
CG5	Capacidad para la resolución de problemas	GENERAL
CG8	Capacidad de razonamiento crítico.	GENERAL
CB3	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética	BÁSICA
CB4	Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado	BÁSICA
CT1	Capacidad de organización y planificación.	TRANSVERSAL

Q CONTENIDOS

TEMA 01: Introducción a la Mecánica Cuántica

TEMA 02: La ecuación de Schrödinger

TEMA 03: Postulados de la Mecánica Cuántica

TEMA 04: Partícula en una caja. Potenciales cuadrados

TEMA 05: El rotor rígido. Espectros de rotación pura

TEMA 06: El oscilador armónico. Espectros de vibración-rotación

TEMA 07: Soluciones aproximadas de la ecuación de Schrodinger

TEMA 08: Átomos hidrogenoides

TEMA 09: Átomos polielectrónicos

TEMA 10: Moléculas diatómicas

TEMA 11: Moléculas poliatómicas

PRÁCTICA 1: Propiedades atómicas (UCA-ATO/GAUSSIAN)

PRÁCTICA 2: Propiedades moleculares (Moléculas diatómicas)

PRÁCTICA 3: Propiedades Moleculares (Moléculas Poliatómicas)

PRÁCTICA 4: Espectroscopía 1

PRÁCTICA 5: Espectroscopía 2

PRÁCTICA 6: Exposición de resultados científicos

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Criterios generales de evaluación

Se valorará la adecuación y claridad de las respuestas a las cuestiones planteadas, en cualquiera de las técnicas o instrumentos utilizados, la capacidad de integración de la información y de coherencia en los argumentos.

"Los alumnos tendrán derecho a una prueba de evaluación global, en las dos convocatorias extraordinarias posteriores a la convocatoria ordinaria (la del cuatrimestre en el que se imparte).

Esta modalidad de evaluación deberá ser solicitada por el alumno en los plazos que el Centro determine. Los criterios de evaluación y tipo de pruebas a realizar serán determinados por el equipo docente de la asignatura e informados con suficiente antelación a aquellos alumnos que la soliciten".

Procedimiento de calificación

En la convocatoria de Febrero:

- 70% examen teórico escrito (35% examen tipo test, 35% examen de problemas)
- 20% informe final de laboratorio y examen oral de prácticas
- 10% Cuestionarios de cada tema contestados en el campus virtual

En la convocatoria de Junio/Septiembre, del curso académico:

- 70% examen teórico escrito (35% examen tipo test, 35% examen de problemas)
- 30% se mantendrán las notas del examen oral de prácticas y las notas de los cuestionarios. Aquellos alumnos que no hayan superado las prácticas, deberán realizar un examen escrito sobre el contenido de las prácticas (a realizar junto al examen de teoría)

Para superar la asignatura se requiere asistencia OBLIGATORIA a las sesiones de laboratorio y al examen oral sobre dichas prácticas.

- Para la convocatoria de febrero, en el caso de no asistir a las sesiones prácticas por motivos justificados y como máximo dos faltas, se tendrá derecho a realizar un examen escrito sobre el contenido de las prácticas que corresponde al 20% de la nota total de la asignatura.
- En las convocatorias de junio y septiembre, los alumnos que no han superado la calificación práctica, tendrán derecho a realizar un examen escrito sobre el contenido de las prácticas que corresponde al 20% de la nota total de la asignatura. En estas convocatorias los alumnos que no han asistido a las prácticas SIN JUSTIFICACIÓN tendrán que hacer un examen escrito/oral y/o práctico, que se decidirá por el profesorado en cada caso, donde se demuestre que el alumno ha adquirido los conocimientos de dichas prácticas.

Para las convocatorias extraordinarias de Junio y Septiembre, se mantendrán las notas obtenidas en el laboratorio (Hojas de resultado y Exposición oral del resumen de las prácticas) y la de los cuestionarios.

No se conservará NINGUNA calificación para el siguiente curso académico por tanto deberán realizarse tanto las prácticas como los cuestionarios de nuevo.

Procedimientos de evaluación

Tarea/Actividades	Medios, técnicas e instrumentos
<ul style="list-style-type: none"> - Cuestionario de cierto/falso con justificación breve de las respuestas - Resolución de problemas con posibilidad de elegir entre varios propuestos 	Examen escrito
Hoja de resultados y/o informe de prácticas	Descripción resumida de la práctica realizada y descripción detallada de los resultados obtenidos
Exposición oral de un resumen de las prácticas realizadas	Exposición oral individual, en el laboratorio, de un resumen de los resultados obtenidos en las sesiones prácticas. Evaluación crítica de los mismos.
Cuestionarios en el campus virtual	Al final de cada tema o bloques de varios temas, se pondrá un cuestionario en el campus virtual con preguntas de a, b, c que deberán realizar el alumno en un plazo preestablecido.

PROFESORADO

Profesorado	Categoría	Coordinador
ZORRILLA CUENCA, DAVID	PROFESOR CONTRATADO DOCTOR	Sí
NAVAS PINEDA, FRANCISCO JAVIER	PROFESOR CONTRATADO DOCTOR	No

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividad	Horas	Detalle
01 Teoría	26	Sesiones donde se expondrán los contenidos teóricos de cada tema y se harán hincapié en aquellos que tengan mayor dificultad.
02 Prácticas, seminarios y problemas	10	Sesiones dedicadas a la resolución de problemas y ejercicios. Aplicación de los conceptos adquiridos en clases teóricas. Se propondrán actividades no presenciales como complemento a las sesiones teóricas y prácticas.
04 Prácticas de taller/laboratorio	24	Sesiones donde se repasarán y ampliarán los conocimientos teóricos y prácticos aplicados a problemas reales. Se realizarán informes finales en cada sesión de práctica. Se expondrán los resultados obtenidos, oralmente de forma sintetizada en una sesión final, y se extraerán las principales conclusiones de dichos resultados.
10 Actividades formativas no presenciales	83,00	<p>Actividades y trabajos personales realizados por los alumnos.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Horas de estudio personales (75 h.) de las cuales se recomienda que el alumno dedique 48 h. al estudio teórico, 18 h. a la resolución de problemas planteados en clase y problemas adicionales, 5 h. a la realización de cuestionarios y/o actividades a través del aula virtual y 4 h. a la preparación de la exposición oral donde se sintetizarán los resultados obtenidos en las sesiones prácticas - Elaboración de un informe final de prácticas que se entregará antes del examen oral de prácticas (8 h)
11 Actividades formativas de tutorías	3,00	Tutorías fuera del aula en las que el profesor orientará al alumno sobre los aspectos más fundamentales de la materia y los objetivos de la misma, y responderá a las preguntas individuales que realicen los alumnos.

Actividad	Horas	Detalle
12 Actividades de evaluación	4,00	Prueba escrita con dos partes: - Cuestionario de cierto/falso con justificación breve de las respuestas (30 min.) - Resolución de dos problemas a elegir entre tres propuestos (180 min.) Prueba oral sobre las prácticas y conocimientos teóricos adquiridos en las sesiones de prácticas.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica

LEVINE, I. N. : Físicoquímica. Vol I y II. McGraw Hill (2004)

ATKINS, P.W.: Físicoquímica. Addison-Wesley Iberoamericana. (1991)

BARROW, G.M. : Química Física. Vol I y II. Ed. Reverté. (1988)

DÍAZ, M. y ROIG, A. : Química Física. Vol I y II. Ed. Alhambra. (1988-89)

REQUENA, A. y ZUÑIGA, J. : Espectroscopía. Prentice Hall (2005)

Bibliografía específica

Manual Editado por los profesores de la asignatura

Bibliografía ampliación

BERTRÁN, J. y NÚÑEZ, J.: Química Física. Ariel Ciencia (2002)
ENGEL T. y REID P.: Química Física. Pearson Educación (2006)
FERNÁNDEZ, M.; RÍUS, P.; FERNÁNDEZ, C. Y ZORRILLA, D.: Elementos de mecánica cuántica molecular. Universidad de Cádiz (2002)
FERNÁNDEZ, M.; FERNÁNDEZ, C.; EDREIRA, M. C. Y ZORRILLA, D.: Problemas de mecánica cuántica molecular. Universidad de Cádiz (2002)
LEVINE, I. N. : Espectroscopía molecular, Editorial AC, Madrid, España, McGraw-Hill, Inc. (1980)
PETER W. ATKINS and RONALD S. FRIEDMAN: Molecular Quantum Mechanics

Prácticas:

James B. Foresman and Æleen Frisch: Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods

Leach Andrew: Molecular Modelling: Principles and Applications

Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry

Christopher J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (Seond Edition)

Jesús Sánchez Márquez: Manual práctico para el cálculo de errores en experiencias de laboratorio

MECANISMOS DE CONTROL

Encuestas de satisfacción a los alumnos. Reuniones de coordinación del profesorado.

El presente documento es propiedad de la Universidad de Cádiz y forma parte de su Sistema de Gestión de Calidad Docente.

En aplicación de la Ley 3/2007, de 22 de marzo, para la igualdad efectiva de mujeres y hombres, así como la Ley 12/2007, de 26 de noviembre, para la promoción de la igualdad de género en Andalucía, toda alusión a personas o colectivos incluida en este documento estará haciendo referencia al género gramatical neutro, incluyendo por lo tanto la posibilidad de referirse tanto a mujeres como a hombres.